

Agilent ChemStation Plus



Guida introduttiva



Agilent Technologies

Avvisi

© Agilent Technologies, Inc. 2004

Nessuna parte di questo manuale può essere riprodotta in alcun formato o con alcun mezzo (inclusa l'archiviazione e la scansione elettroniche o la traduzione in una lingua straniera) senza previo consenso scritto di Agilent Technologies, Inc. secondo le disposizioni di legge sul diritto d'autore degli Stati Uniti, internazionali e locali applicabili.

Codice del manuale

G2181-94011

Edizione

03/2004

Stampato in Germania

Agilent Technologies Deutschland GmbH
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germania

Microsoft® è un marchio registrato negli Stati Uniti della Microsoft Corporation.

Revisione software

Questa guida è valida per le versioni A.01.xx del software per Agilent ChemStation Plus, dove xx indica revisioni minori del software che non influenzano l'accuratezza tecnica di questa guida.

Garanzia

Le informazioni contenute in questo documento sono fornite allo stato corrente e sono soggette a modifiche senza preavviso nelle edizioni future. Agilent non rilascia alcuna garanzia, esplicita o implicita, relativamente al presente manuale e alle informazioni in esso contenute. Salvo il caso di dolo o colpa grave Agilent non sarà responsabile di errori o danni diretti o indiretti relativi alla fornitura o all'uso di questo documento o delle informazioni in esso contenute. In caso di separato accordo scritto fra Agilent e l'utente con diverse condizioni di garanzia relativamente al contenuto di questo documento in conflitto con le condizioni qui riportate, prevarranno le condizioni dell'accordo separato.

Licenze sulla tecnologia

I componenti hardware e/o software descritti in questo documento vengono forniti con licenza e possono essere utilizzati o copiati solo in conformità ai termini di tale licenza.

Indicazioni di sicurezza

AVVERTENZA

L'indicazione **AVVERTENZA** segnala un rischio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare danni al prodotto o la perdita di dati importanti. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'**AVVERTENZA**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

ATTENZIONE

L'indicazione **ATTENZIONE** segnala un rischio serio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare lesioni personali o morte. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'indicazione **ATTENZIONE**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

In questo volume...

Questa guida contiene esercizi e istruzioni dettagliate per l'utilizzo della ChemStation Plus Agilent. La guida descrive in particolare le nuove funzioni disponibili tramite l'integrazione di ChemStore nella ChemStation. La guida è organizzata come segue:

1 Introduzione

Questo capitolo illustra i concetti della ChemStation Plus. Viene illustrato e spiegato il flusso di lavoro del pacchetto software. Viene inoltre spiegato come avviare la ChemStation Plus e prepararla per l'uso.

2 Impostazione di una sequenza

Il capitolo spiega come impostare ed effettuare una sequenza. Viene inoltre spiegato come assegnare uno studio alla propria sequenza e come operare con dati personalizzati.

3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Nel capitolo viene spiegato come impostare una query e come recuperare i dati nel client di revisione di ChemStore.

4 Riesame dei dati con il client di revisione di ChemStore

In questo capitolo viene illustrato come personalizzare l'interfaccia utente del client di revisione di ChemStore. Viene inoltre spiegato come esaminare e valutare i risultati.

5 Presentazione dei risultati

Il capitolo spiega come ottenere e filtrare i propri dati e come presentare i propri risultati nel client di revisione di ChemStore.

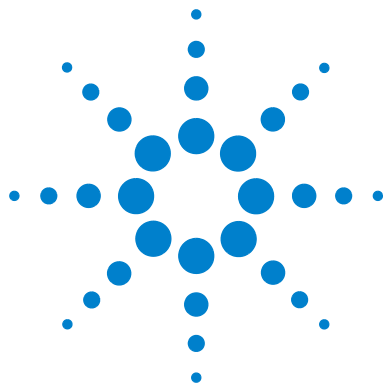
6 Rielaborazione di lotti

In questo capitolo viene spiegato come selezionare un processo di trasferimento per la revisione di lotti, come trasferire un lotto alla ChemStation Plus e come elaborare i risultati.

Sommario

1	Introduzione	7
	Concetti della ChemStation Plus	8
	Flusso di lavoro con la ChemStation Plus	10
	Avvio ChemStation Plus	12
	Collegarsi alla ChemStation.	12
2	Impostazione di una sequenza	15
	Selezione di una sequenza	16
	Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati	17
	Esecuzione di una sequenza	23
3	Recupero dei risultati nella ChemStation Plus	25
	Costruzione di una query	26
4	Riesame dei dati con il client di revisione di ChemStore	35
	Layout dell'interfaccia utente	36
	Modifica del layout dell'interfaccia utente	38
	Opzioni di layout	38
5	Presentazione dei risultati	43
	Preparazione del rapporto	44
	Come filtrare i dati	45
	Creazione del rapporto	52

6	Rielaborazione di lotti	53
	Creazione e caricamento di lotti	54
	Integrazione manuale	59



1

Introduzione

Concetti della ChemStation Plus 8

Flusso di lavoro con la ChemStation Plus 10

Avvio ChemStation Plus 12

Questo capitolo illustra i concetti della ChemStation Plus. Viene illustrato e spiegato il flusso di lavoro del pacchetto software. Viene inoltre spiegato come avviare la ChemStation Plus e prepararla per l'uso.



Concetti della ChemStation Plus

La ChemStation Plus è un sistema di gestione dati in rete integrato (NDS). La ChemStation Plus viene utilizzata in ambiente client/server. Il principale obiettivo del software è quello di supportare il laboratorio nel raggiungimento dei requisiti FDA per le registrazioni e le firme elettroniche secondo il CFR 21 Parte 11. La ChemStation Plus può essere acquistata in varie combinazioni ed installata con molteplici opzioni di configurazione.

La ChemStation Plus rispecchia il flusso di lavoro di un laboratorio chimico per lo sviluppo di metodi, l'acquisizione dei dati e la loro elaborazione, archiviazione e revisione, la stesura di rapporti.

La ChemStation Plus consiste in un insieme di programmi. Ciascun programma ha specifiche capacità.

ChemStation

La ChemStation controlla vari strumenti analitici Agilent. È progettata per acquisire dati cromatografici 2D e 3D e per fornire un completo set di strumenti software per l'analisi qualitativa e quantitativa dei dati.

ChemStore

ChemStore gestisce i risultati della ChemStation. Utilizzando un database, tutti i dati correlati possono essere recuperati, riesaminati e presentati in un rapporto.

Security Pack

Il Security Pack fornisce le funzioni di sicurezza e rintracciabilità necessarie per la conformità e il mantenimento di registrazioni in condizioni di sicurezza.

Pacchetto di validazione del metodo

Il pacchetto di validazione del metodo in aggiunta a ChemStore fornisce gli strumenti necessari per organizzare, automatizzare e documentare gli studi di validazione del metodo.

ChemAccess

ChemAccess è un software progettato per lavorare con molteplici ChemStation collegate a un server tramite una rete. ChemAccess controlla le ChemStation e tutti gli strumenti collegati ad esse tramite accesso remoto.

Flusso di lavoro con la ChemStation Plus

La ChemStation Plus rispecchia il flusso di lavoro di un laboratorio analitico. ChemStation e ChemStore insieme coprono le azioni necessarie al funzionamento. Alcune azioni, quali l'acquisizione dei dati e il calcolo dei risultati, sono effettuate dalla ChemStation. Altre azioni, quali la revisione e la valutazione dei dati, sono effettuate da ChemStore.

Flusso di lavoro caratteristico

Impostazione iniziale della ChemStation Plus.

- a** Impostazione dei campi personalizzati necessari.
 - b** Creazione di uno studio. Uno studio è una cartella nella quale sono archiviati i dati dopo una analisi.
- 1** Effettuazione delle analisi e acquisizione dei dati nella finestra **Method and Run Control** della ChemStation.
 - a** Impostazione di una sequenza.
 - b** Assegnazione di uno studio e personalizzazione dei campi.
 - c** Effettuazione della sequenza.
- 2** Impostazione di una query in ChemStore.
- 3** Riesame dei dati nel client di revisione di ChemStore.
 - a** Rifiuto o approvazione delle analisi o contrassegno per la rielaborazione.
 - b** Creazione di un lotto.
- 4** Effettuazione della rielaborazione delle analisi nella finestra **Data Analysis** della ChemStation.
 - a** Caricamento di un lotto in ChemStore.
 - b** Rielaborazione del lotto.
 - c** Correzione del metodo di rielaborazione.
- 5** Definizione e stampa dei rapporti e dei diagrammi.

Il seguente schema visualizza il flusso di lavoro caratteristico per la ChemStation Plus. Le azioni incorniciate da una linea tratteggiata sono effettuate nella ChemStation, quelle incorniciate da una linea continua sono effettuate da ChemStore.

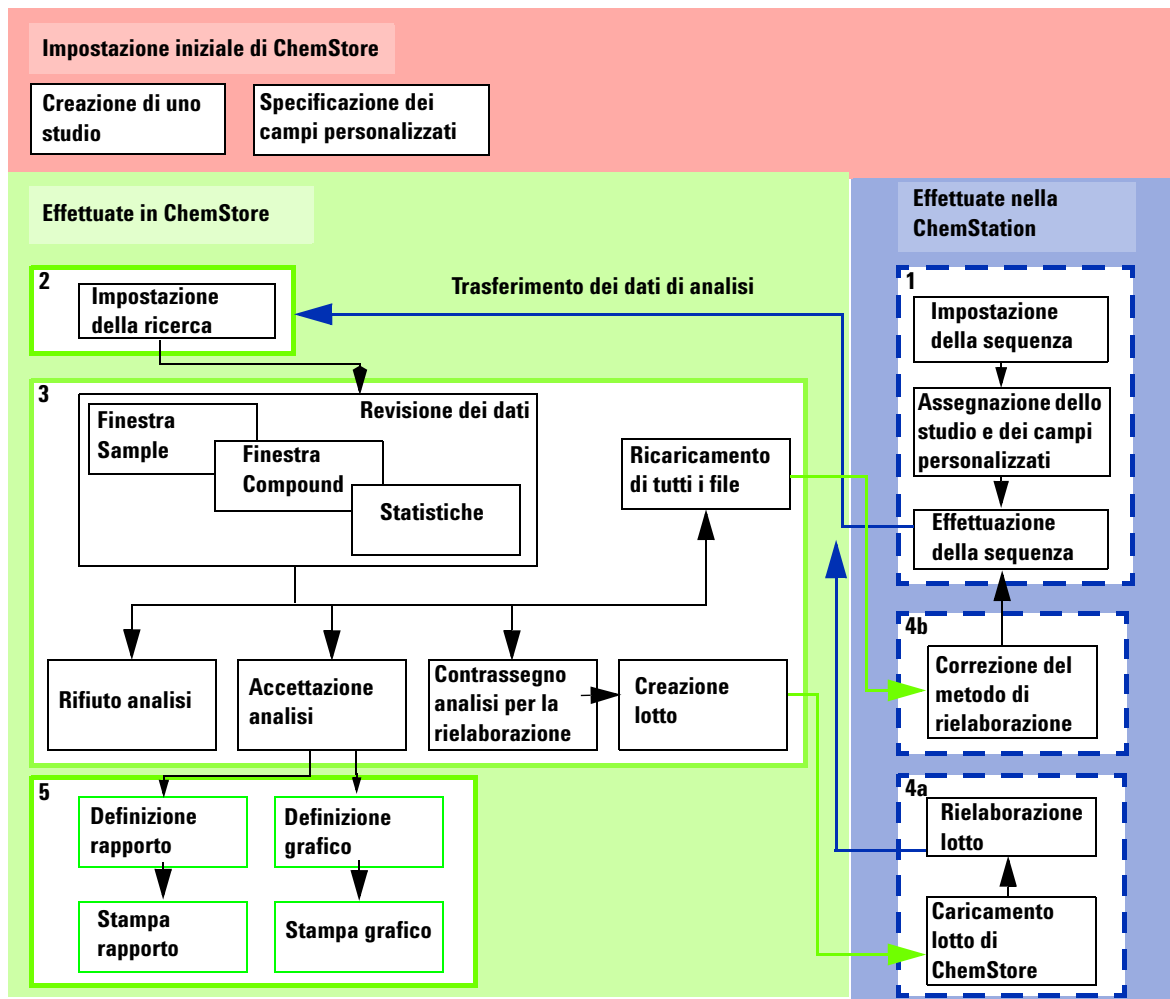


Figura 1 Flusso di lavoro della ChemStation Plus

Avvio ChemStation Plus

Prima dell'avvio

- L'amministratore ha:
 - installato tutti il pacchetti software necessari per la ChemStation Plus.
 - configurato gli strumenti.
 - impostato come database da usare il database demo inviato con ChemStore (ChemStoreDemo).
 - creato studi e campi personalizzati.

Consultare la Guida all'installazione per le procedure appropriate.

Collegarsi alla ChemStation.

- 1 Selezionare **Start > Program > ChemStations > Instrument 1 Offline**.

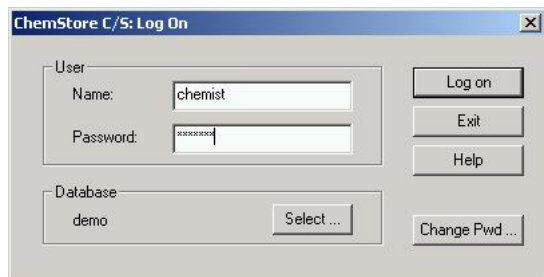


Figura 2 Finestra di connessione

- a Inserire nel campo **Name** chemist.
- b Inserire nel campo **Password** chemist.
- c Fare clic sul tasto **Log on**.

2 Un messaggio informa che la password è scaduta.



Figura 3 Password scaduta

a Chiudere la finestra del messaggio facendo clic su **OK**.

3 Verrà aperta la finestra di dialogo **Change User Password**.

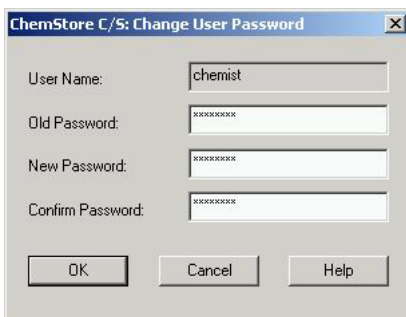


Figura 4 Modifica della password

a Inserire nel campo **Old Password** chemist.

b Inserire nel campo **New Password** ad esempio 12345678.

c Inserire nel campo **Confirm Password** ad esempio 12345678.

d Fare clic sul tasto **OK** per modificare la password.

1 Introduzione

Avvio ChemStation Plus

- 4 L'interfaccia per l'utente della ChemStation Plus si apre alla finestra **Method and Run Control**.

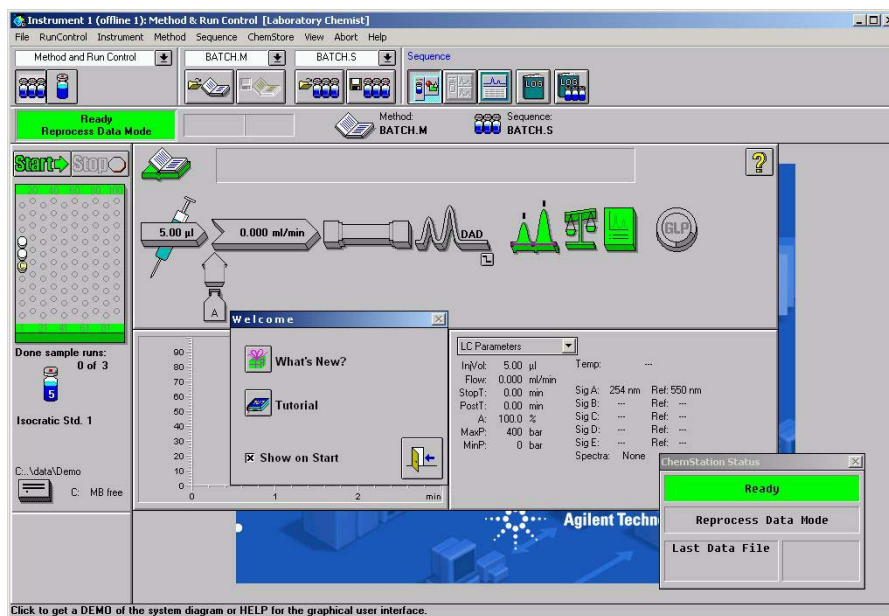
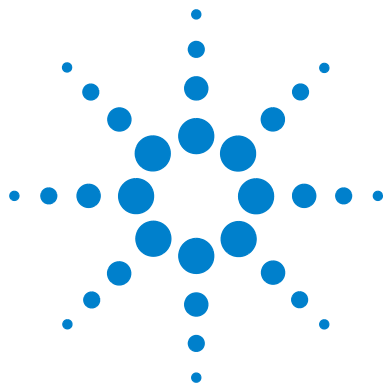


Figura 5 Interfaccia utente della ChemStation Plus

- 5 Per avviare il client di revisione di ChemStore, selezionare **View > Chemstore Review Client**.



2

Impostazione di una sequenza

Selezione di una sequenza 16

Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati 17

Esecuzione di una sequenza 23

Il capitolo spiega come impostare ed effettuare una sequenza. Viene inoltre spiegato come assegnare uno studio alla propria sequenza e come operare con campi personalizzati.



Selezione di una sequenza

Una sequenza è una serie di istruzioni che automatizzano l'analisi dei campioni. Una sequenza può automaticamente iniettare ciascun campione, acquisire ed elaborare i dati secondo il metodo specificato e stampare un rapporto per ciascun campione. Per ciascun campione può essere generato un rapporto conciso con calcoli statistici. Ciascun campione può essere analizzato con un diverso metodo, quindi diversi gruppi di condizioni strumentali e parametri di valutazione possono essere applicati ai vari campioni.

Prima dell'avvio

- Collegarsi alla ChemStation.
- Avviare nella ChemStation la sessione Instrument 1 in modalità Offline.

Caricamento di una sequenza

- 1 Selezionare nella ChemStation la finestra **Method and Run Control**.
- 2 Selezionare **Sequence > Load Sequence** o fare clic sull'icona .

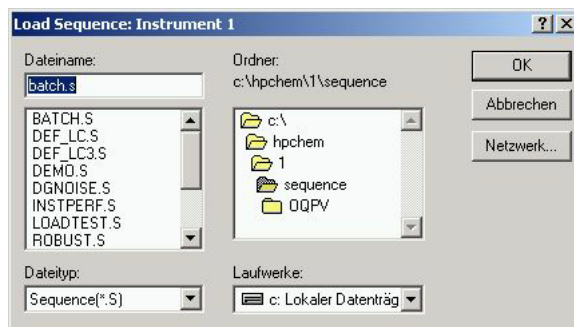


Figura 6 Caricamento di una sequenza

- a Selezionare nella finestra di dialogo **Load Sequence; Instrument 1** c:\hpchem\1\sequence\ **Batch.S**.
- b Fare clic su **OK**.

Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati

- 1 Selezionare nella finestra **Method and Run Control Sequence > ChemStore Setup**.

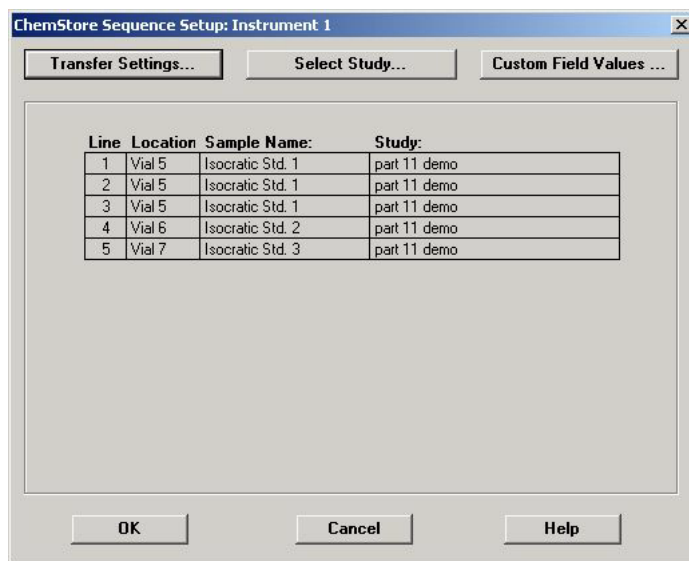


Figura 7 Finestra ChemStore Sequence Setup

Impostazioni di trasferimento

NOTA

Se il Security Pack non è installato, è possibile selezionare di non trasferire i dati dopo la loro acquisizione.

2 Impostazione di una sequenza

Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati

2 Fare clic sul tasto **Transfer Settings**.

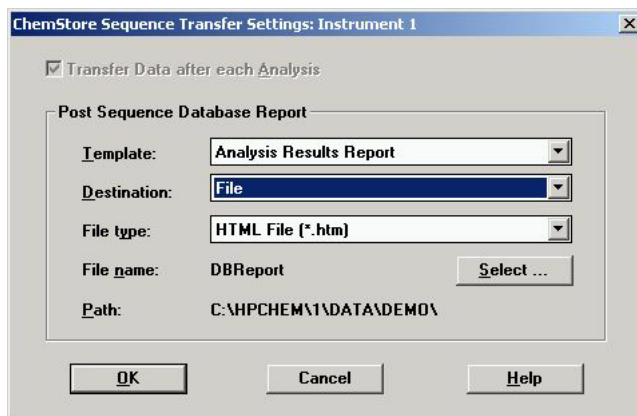


Figura 8 Impostazioni di trasferimento

- a Selezionare nell'elenco a discesa **Template** > **Analysis Results Report**.
- b Selezionare nell'elenco a discesa **Destination** > **File**.
- c Selezionare nell'elenco a discesa **File type** > **HTML file (*.htm)**.
- d Fare clic sul tasto **Select**.

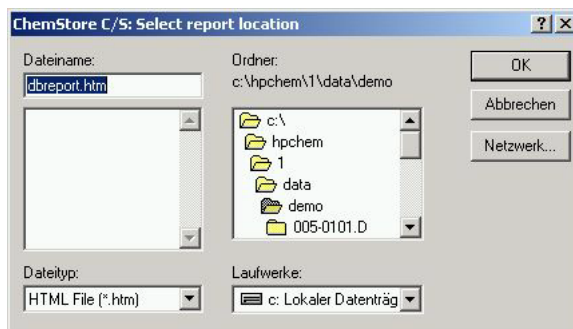


Figura 9 Finestra Select report location

- e Fare clic su **OK**.
- f Chiudere la finestra di dialogo **Transfer Settings** facendo clic su **OK**.

Assegnazione di uno studio

- 3 Nella finestra di dialogo **ChemStore Sequence Setup** fare clic sul tasto **Select Study**.

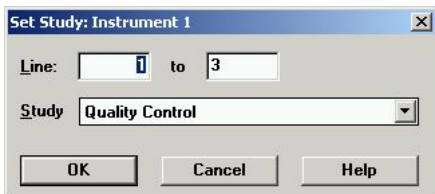


Figura 10 Selezione dello studio

- a Per le linee da 1 a 3 selezionare nell'elenco a discesa **Study** lo studio **Quality Control**.
- b Fare clic su **OK**.
- c Nella finestra di dialogo **ChemStore Sequence Setup** fare nuovamente clic sul tasto **Select Study**.



- d Per le linee da 4 a 5 selezionare nell'elenco a discesa **Study** lo studio **procaine decay**.
- e Fare clic su **OK**.

2 Impostazione di una sequenza

Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati

Assegnazione dei campi personalizzati

- 4 Nella finestra di dialogo **ChemStore Sequence Setup** fare clic sul tasto **Custom Field Values**.

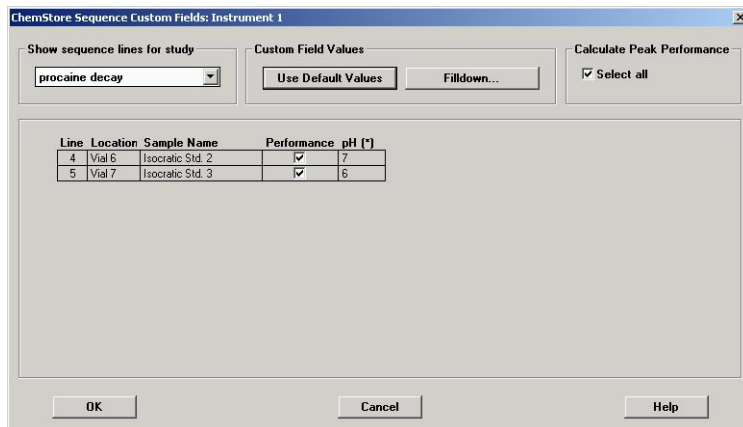


Figura 11 Valori di campo personalizzati

- a Selezionare l'opzione **Select all** nel campo **Calculated Peak Performance**.
- b Impostare i valori di pH per le linee **4** e **5**, ad esempio 7 e 6.
- c Fare clic su **OK**.

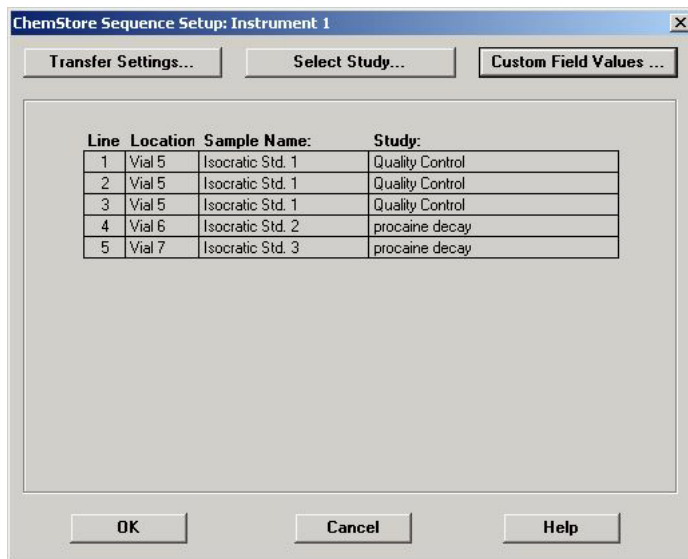


Figura 12 Finestra ChemStore Sequence Setup

5 Nella finestra di dialogo **ChemStore Sequence Setup** fare clic sul tasto **OK**.

6 Un messaggio informa che la sequenza è stata modificata.

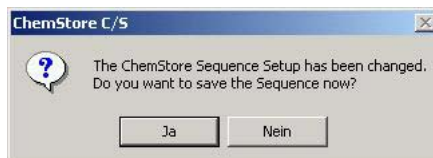
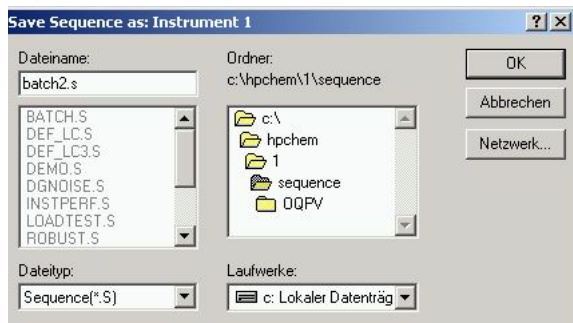


Figura 13 Messaggio di sequenza modificata

a Fare clic su **OK** per salvare le modifiche alla sequenza.

2 Impostazione di una sequenza

Assegnazione dello studio e dei campi personalizzati



- 7 Salvare la sequenza come **batch2.S**, poiché la sequenza originale, **Batch.S**, è protetta da scrittura.
- 8 Fare clic su **OK**.

Esecuzione di una sequenza

- 1 Fare clic sul tasto **Start**  nell'interfaccia utente della finestra **Method and Run Control**.

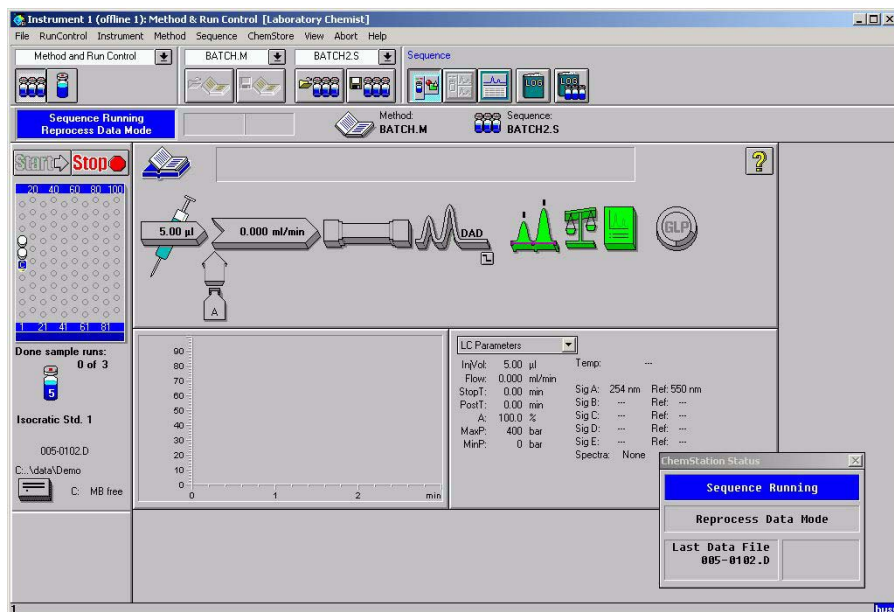


Figura 14 Esecuzione di una sequenza

La ChemStation Plus esegue la sequenza secondo i metodi selezionati e archivia i dati negli studi definiti.

2 **Impostazione di una sequenza**

Esecuzione di una sequenza



3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Costruzione di una query 26

Nel capitolo viene spiegato come mettere a punto una query e come recuperare i dati nel client di revisione di ChemStore.



Costruzione di una query

Una query è il mezzo per recuperare i risultati in ChemStore dopo il completamento del trasferimento e dell'acquisizione dei dati nella ChemStation. È possibile costruire query semplici e avanzate. Con la funzione di query avanzata sono disponibili criteri di ricerca aggiuntivi.

In questa sezione verranno ricercati i dati trasferiti dalla sequenza che è stata effettuata nella sezione precedente.

Prima dell'avvio

- Collegarsi al client di revisione di ChemStore.

Creazione di una query avanzata

- 1 Nel client di revisione di ChemStore selezionare **File > Create Query > Advanced**.

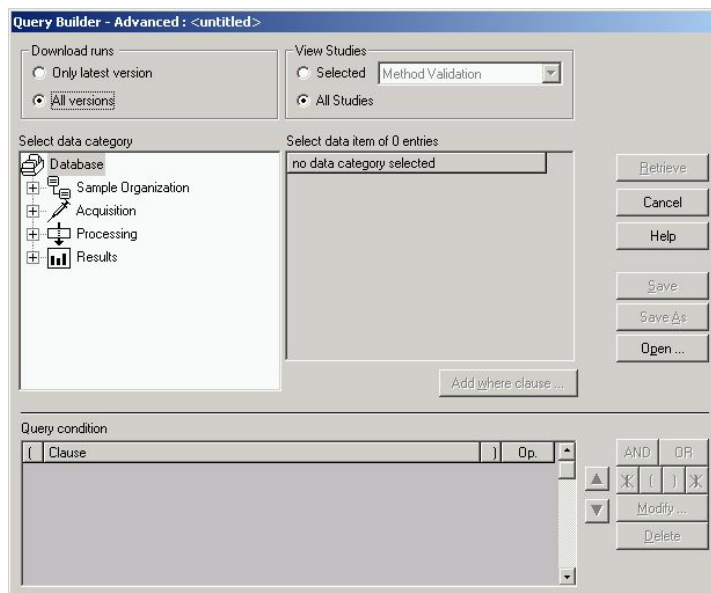


Figura 15 Creazione di una query

Selezione dei criteri di selezione

- 1 Selezionare nel campo **Select data category > Database > Sample Organization > Acquisition > Sequence > Acq. Sequence Name**.
 - a Selezionare nel campo **Acq. Sequence Name > Batch.S**.

3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Costruzione di una query

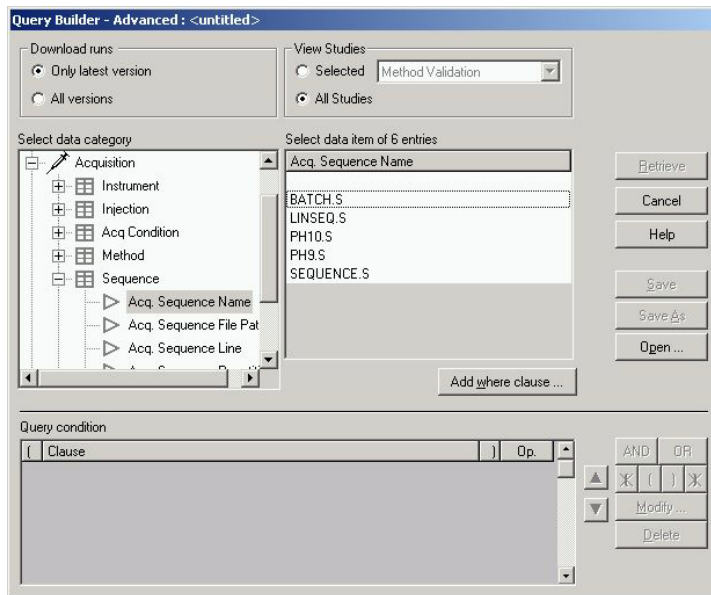


Figura 16 Selezione della sequenza

- b** Fare clic sul tasto **Add where clause...** per definire i criteri di ricerca dettagliati.

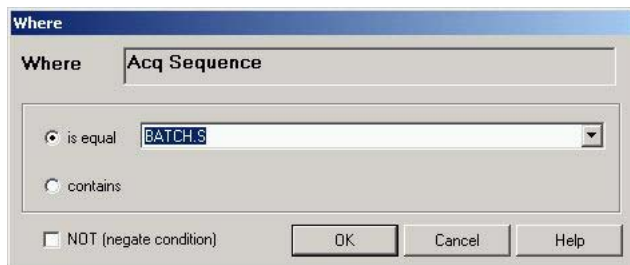


Figura 17 Aggiunta di una clausola Where

- c** Contrassegnare l'opzione **is equal**.
- d** Selezionare **BATCH.S** dall'elenco a discesa.

- e Fare clic su **OK**.
- f La condizione di query selezionata viene riportata nel campo **Query condition**.

Costruzione di una condizione logica

- 1 Selezionare nella finestra di dialogo **Query Builder** nel campo **Select data category** > **Database** > **Sample Organization** > **Study** > **Study Name**.
 - a Selezionare nel campo **Study Name** > **Quality Control**.

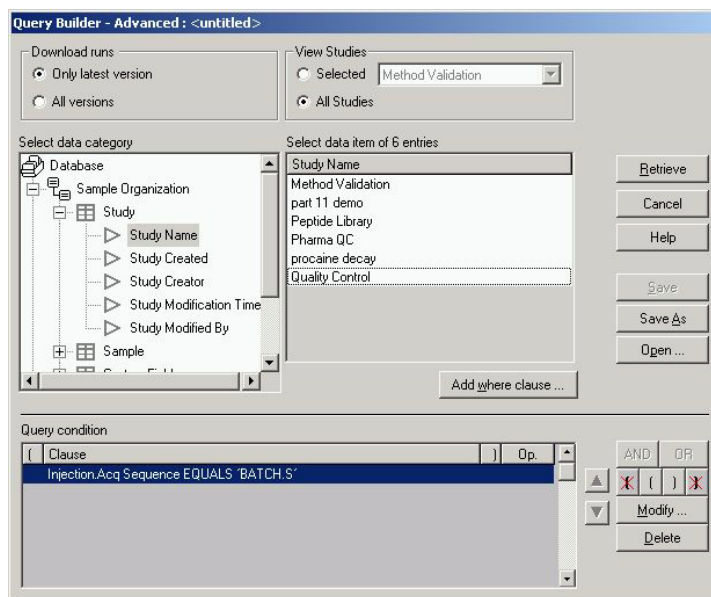


Figura 18 Selezione di uno studio

- b Fare clic sul tasto **Add where clause...** per definire i criteri di ricerca dettagliati.

3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Costruzione di una query

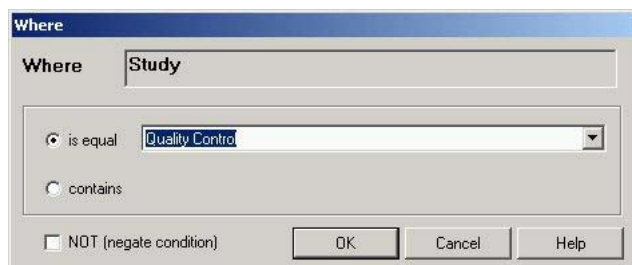


Figura 19 Aggiunta di una clausola Where

- c** Contrassegnare l'opzione **is equal**.
- d** Selezionare **Quality Control** dall'elenco a discesa.
- e** Fare clic su **OK**.
- f** La condizione di query selezionata viene riportata nel campo **Query condition**.

- 2 Selezionare nella finestra di dialogo **Query Builder** nel campo **Query Condition** il tasto **Open Bracket** .

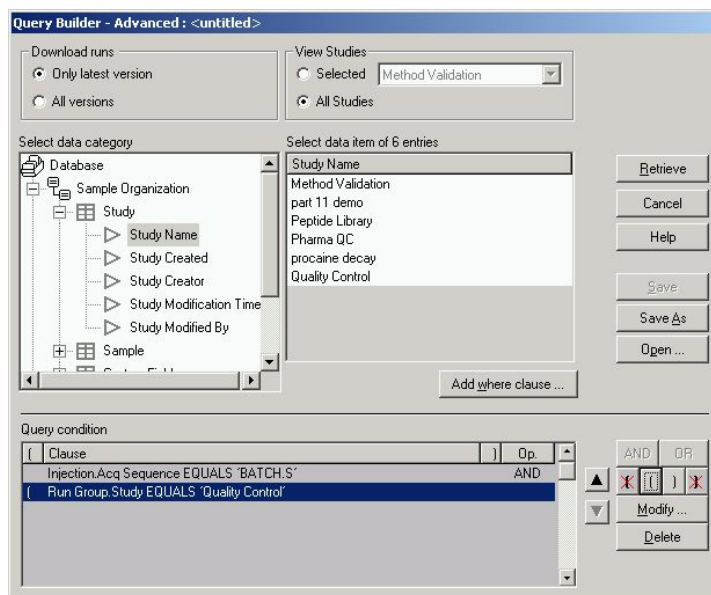


Figura 20 Aggiunta di condizioni di query

- 3 Fare nuovamente clic sul tasto **Add where clause...**
 - a Contrassegnare l'opzione **is equal**.
 - b Selezionare lo studio **procaine decay** dall'elenco a discesa.
 - c Fare clic su **OK**.
 - d La condizione di query selezionata viene riportata nel campo **Query condition**.

3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Costruzione di una query

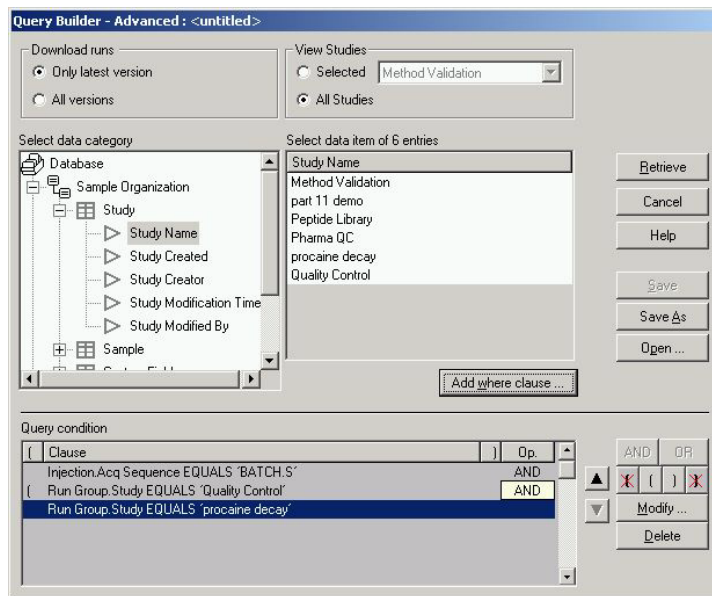


Figura 21 Costruzione di una condizione logica di query

- e Fare clic sulla condizione **AND** nel campo **Query condition**.
- f I tasti **AND** e **OR** diventano attivi.
- g Fare clic sul tasto **OR** .

NOTA

Se il nome della sequenza non è unico, è necessario solo aggiungere qui il nome dello studio. In questo caso la sequenza batch.s è già stata trasferita al database, quindi è necessario un secondo "criterio di ricerca" per ottenere solo i "propri" dati.

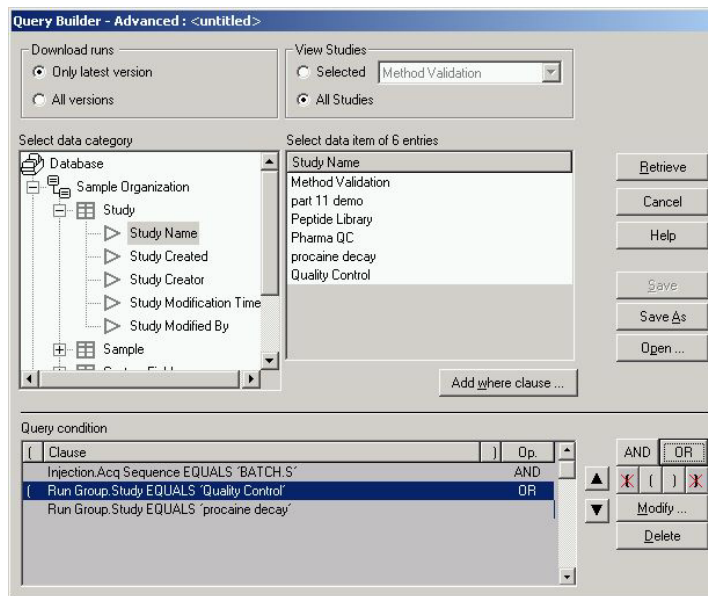


Figura 22 Aggiunta della condizione OR

- h** Evidenziare la terza condizione di query per procaine decay.
- i** Fare clic sul tasto **Close Bracket** .
- j** Le condizioni logiche di ricerca sono definite.

3 Recupero dei risultati nella ChemStation Plus

Costruzione di una query

Salvataggio di una query

- 4 Fare clic sul tasto **Save** nella finestra di dialogo **Query Builder**.

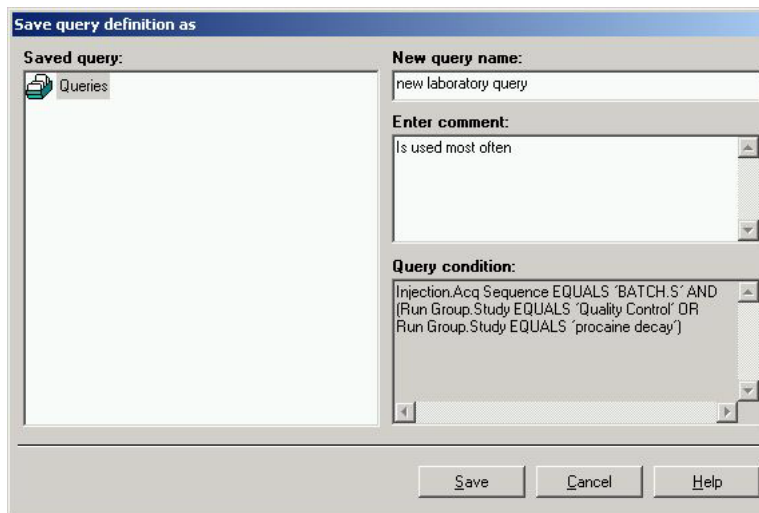


Figura 23 Finestra Save query definition as

- a Nel campo **New query name** inserire new laboratory query.
- b Inserire un commento nel campo **Enter comment**, ad esempio Is used most often.
- c Fare clic sul tasto **Save** nella finestra di dialogo **Save query definition as**.
- d La query è ora salvata e può essere selezionata in **File > Run Query > new laboratory (+)**.

Esecuzione di una query

- 1 Per avviare la query **new laboratory** appena creata, fare clic sul tasto **Retrieve**.



4

Riesame dei dati con il client di revisione di ChemStore

Layout dell'interfaccia utente 36

Modifica del layout dell'interfaccia utente 38

In questo capitolo viene illustrato come personalizzare l'interfaccia per l'utente del client di revisione di ChemStore. Viene inoltre spiegato come esaminare e valutare i risultati.



Layout dell'interfaccia utente

Quando si apre per la prima volta il client di revisione di ChemStore non è definita alcuna interfaccia utente e lo schermo non mostra alcun dato. Anche se tutti i dati sono disponibili, nessuno di essi viene visualizzato finché non si definisce una interfaccia per l'utente e si selezionano i dati da visualizzare.

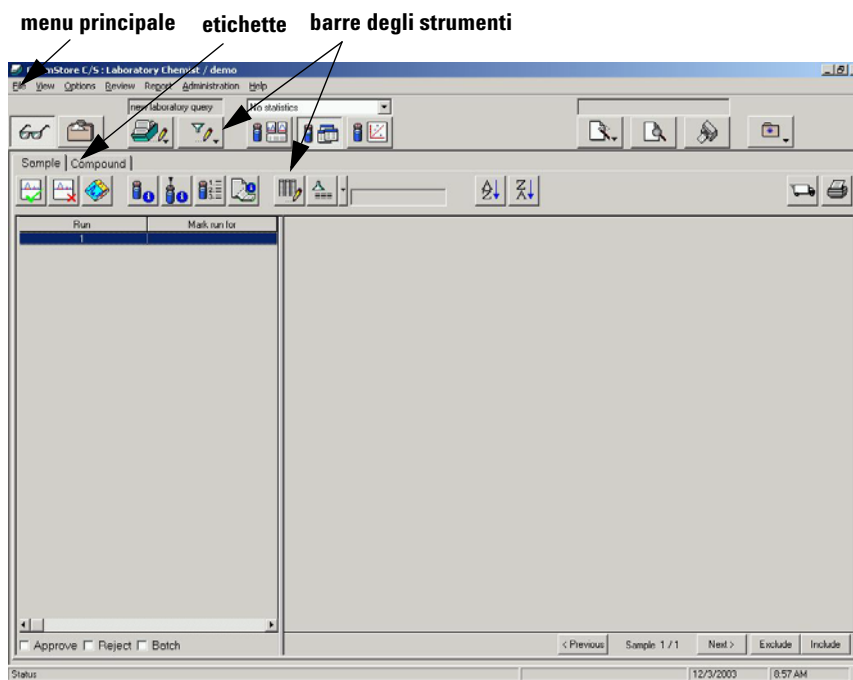


Figura 24 Interfaccia utente vuota

Il layout della finestra contiene la barra del menu principale, la barra degli strumenti principale e le due etichette **Sample** e **Compound**.

Menu principale

Nel menu principale sono disponibili le seguenti funzioni:

- avvio e modifica delle query
- scelta delle differenti opzioni di visualizzazione dei risultati

- creazione di diagrammi e tabelle
- creazione e modifica dei filtri per i dati
- creazione e modifica dell'interfaccia utente
- creazione, revisione ed elaborazione di lotti di analisi per la ChemStation
- creazione e modifica dei rapporti
- modifica della propria password

Barre degli strumenti

La barra degli strumenti contiene le icone per le funzioni del menu più spesso utilizzate. Per vedere la funzione di una icona, spostare il cursore sopra di essa: una finestra di pop-up mostrerà il nome della funzione. Consultare a pagina 31 la Guida ai concetti della ChemStation Plus per ulteriori informazioni sulle barre degli strumenti.

Etichetta Sample

Usare la finestra Sample per vedere separatamente ciascuna iniezione (nome del campione e ora dell'iniezione).

Etichetta Compound

Usare la finestra Compound per vedere i diversi valori relativi all'iniezione, ad esempio informazioni sul picco, tempo di ritenzione o area.

Modifica del layout dell'interfaccia utente

È possibile modificare il layout dell'interfaccia utente per adattarla alle proprie esigenze. La modifica del layout dipende dal tipo di risultati che si vogliono visualizzare e da come si desidera che essi siano visualizzati. È possibile salvare il layout preferito.

Prima dell'avvio

- 1 Selezionare e avviare una query per i risultati da esaminare.
- 2 Selezionare il menu **Options > Change User Interface Setting > Quality Control**, oppure fare clic nella barra degli strumenti sull'icona **User Interface Menu**  e selezionare **Quality Control**.
- 3 Provare le seguenti opzioni di layout.

Opzioni di layout

NOTA

Tutti i dati sono disponibili per la visualizzazione. L'opzione di layout consente di selezionare il tipo di dati da visualizzare.

Tabella 1 Etichetta Sample

Icona	Descrizione
	In Review Layout è possibile visualizzare: • le informazioni del campione sulla sinistra della finestra • il cromatogramma dei risultati nella parte superiore destra della finestra • il tipo selezionato di tabella dei risultati nella parte inferiore destra della finestra

Tabella 1 Etichetta Sample

Icona	Descrizione
	In Table Layout è possibile visualizzare: - le informazioni del campione sulla sinistra della finestra - il tipo selezionato di tabella dei risultati nella parte destra della finestra
	In Chart Layout è possibile visualizzare: - le informazioni del campione sulla sinistra della finestra - un diagramma creato nella metà destra della finestra

Tabella 2 Etichetta Compound

Icona	Descrizione
	In Review Layout è possibile visualizzare: - le informazioni del campione sulla sinistra della finestra - il cromatogramma e il diagramma dei risultati nella parte superiore destra della finestra - il tipo selezionato di tabella dei risultati nella parte inferiore destra della finestra
	In Table Layout è possibile visualizzare: - le informazioni del campione sulla sinistra della finestra - il tipo selezionato di tabella dei risultati nella parte destra della finestra
	In Chart Layout è possibile visualizzare: - le informazioni del campione sulla sinistra della finestra - un diagramma creato nella metà destra della finestra

Selezione dei risultati per la visualizzazione

È possibile scegliere fra numerosi tipi di dati da esaminare nella tabella dei risultati. Per modificare la visualizzazione della tabella dei risultati, selezionare il menu **Options > Columns > Define...** oppure fare clic sull'icona Table .

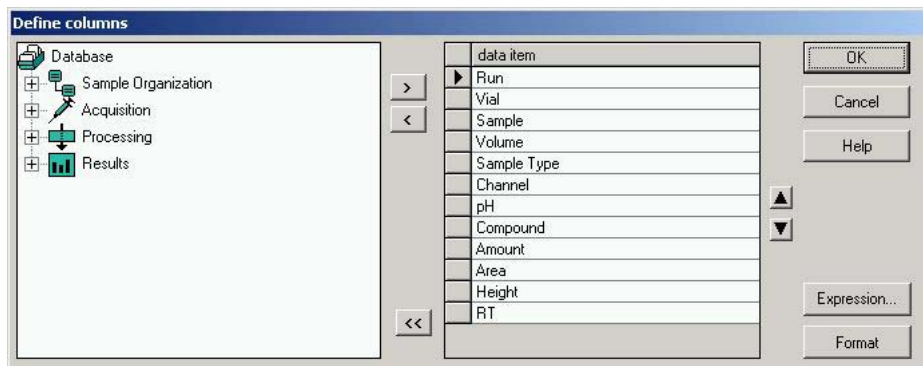


Figura 25 Definizione delle colonne

- 1 Selezionare nella struttura di selezione i tipi di dati da esaminare, ad esempio **Sample Organization > Sample > Sample Name**.
 - a Fare clic sul tasto "freccia a destra" per aggiungere questa categoria di dati alla propria tabella dei risultati.

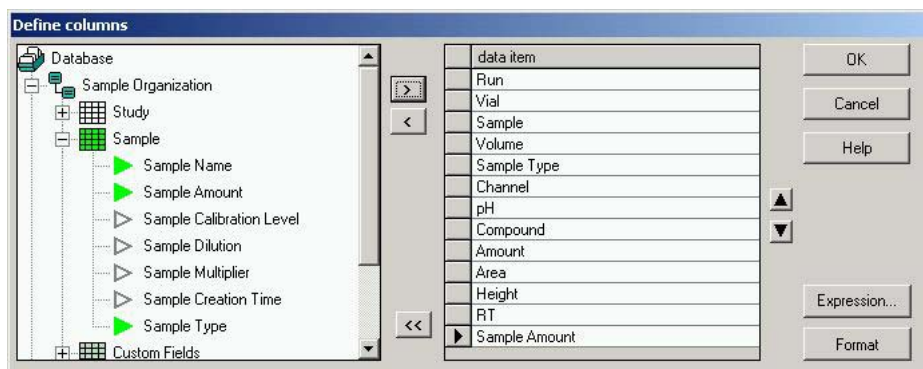


Figura 26 Tipo di dato aggiunto

- b Fare clic su **OK** per aggiungere questo tipo di dato alla propria tabella dei risultati.

Salvataggio dell'interfaccia utente personalizzata

- 1 Selezionare il menu **Option > Save User Interface Setting....**

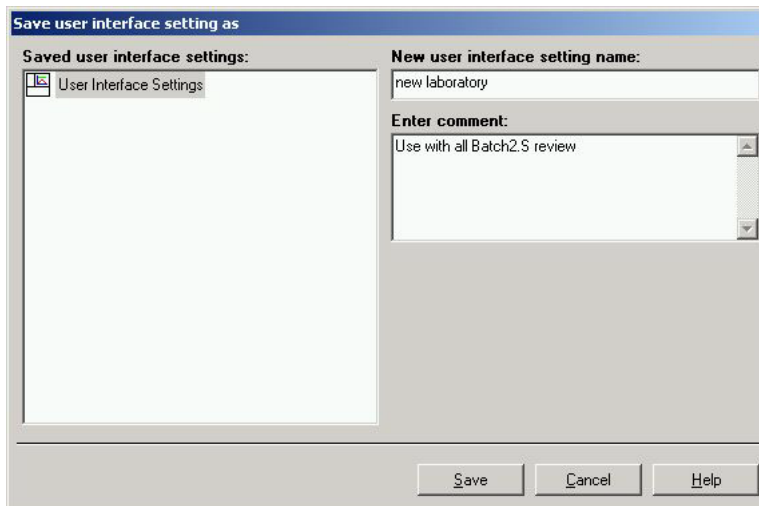


Figura 27 Finestra Save user interface setting as

- a Inserire un nome nel campo **New user interface setting name**.
- b Inserire un commento (opzionale).
- c Fare clic su **Save** per salvare la nuova interfaccia utente.
- d Ora è possibile selezionare la nuova interfaccia utente con **Options > Change User Interface Setting > new laboratory**.

Per selezionare il layout della nuova interfaccia utente, fare clic sull'icona

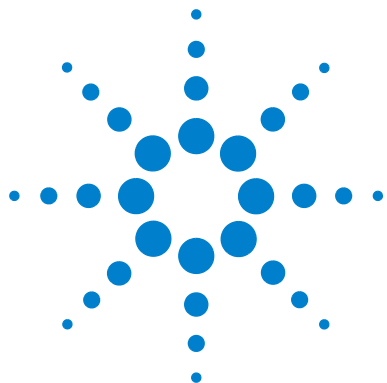


NOTA

Ogni volta che si modifica una interfaccia utente o si chiude il client di revisione di ChemStore, viene chiesto se si desidera salvare l'impostazione dell'interfaccia utente (UI). Una volta definito il layout più adatto alle proprie esigenze, è bene rispondere "No" a questa domanda.

4 Riesame dei dati con il client di revisione di ChemStore

Modifica del layout dell'interfaccia utente



5 Presentazione dei risultati

Preparazione del rapporto 44

Come filtrare i dati 45

Creazione del rapporto 52

Il capitolo spiega come ottenere e filtrare i propri dati e come presentare i propri risultati nel client di revisione di ChemStore.



Preparazione del rapporto

Prima dell'avvio

Collegarsi a ChemStore come utente "chemist", fare riferimento al [Capitolo 1](#), "Introduzione".

Effettuazione di una query

Selezionare la query **new laboratory** che è stata creata nel [Capitolo 4](#). Quando si è collegati come utente "chemist", è possibile vedere unicamente questa query.

Fare clic sul tasto **File > Run Query > new laboratory(+)**.

Per avviare la query **new laboratory** fare clic sui tasti **Execute** e **Retrieve**.

Filtrazione dei dati per il rapporto

- 1 Fare clic sul tasto **Table layout** nel menu principale.
- 2 Selezionare l'etichetta Compound.
- 3 Fare clic sul tasto **View > Create Filter** nel menu principale per creare un filtro.
- 4 Selezionare la categoria di dati che interessa (in "result field") e scegliere un valore fra quelli disponibili nella tabella dei dati.
- 5 Fare clic sul tasto **Save as** nella tabella e inserire un commento.
- 6 Fare clic sul tasto **Save** nella tabella per salvare il filtro attuale.
- 7 È possibile attivare (On) o disattivare (Off) il filtro attuale nel menu **View > Filter** o facendo clic sul tasto  nella barra degli strumenti.

Selezione del rapporto

Fare clic sul tasto **report** nel menu principale.

Menu principale

Nel menu principale sono disponibili le seguenti funzioni per la preparazione del rapporto:

- select report - per scegliere un rapporto dal menu
- print report - per stampare il rapporto in un file o sulla stampante

Come filtrare i dati

NOTA

I criteri di filtrazione sono determinati da quali voci di dati sono visibili nella tabella.

Attivazione del filtro

- 1 Fare clic sul tasto **View > Filter > On** nel menu principale per attivare il filtro.

Selezione del filtro

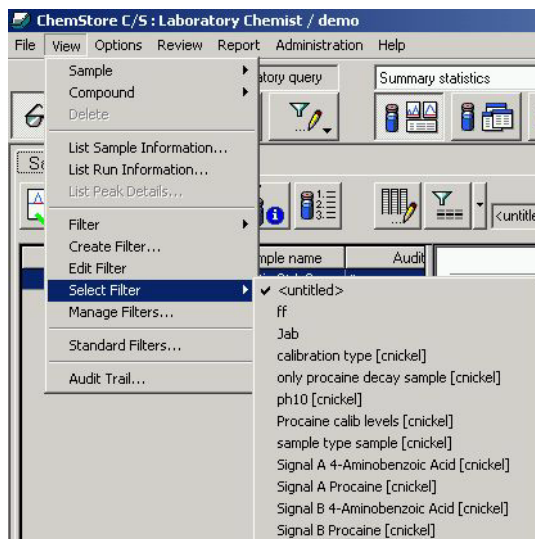


Figura 28 Selezione del filtro

- a È possibile selezionare e usare un filtro esistente.
- b Fare clic sul tasto **View > Select Filter > sample type sample** nel menu principale per selezionare il filtro.

Creazione del proprio menu per l'interfaccia utente

Fare riferimento al [Capitolo 4](#), "Modifica del layout dell'interfaccia utente", da pagina 38 in questa guida.

Creazione del proprio filtro

- 1 Fare clic sul tasto **View > Create Filter** nel menu principale per creare la tabella **Filter - Advanced**.

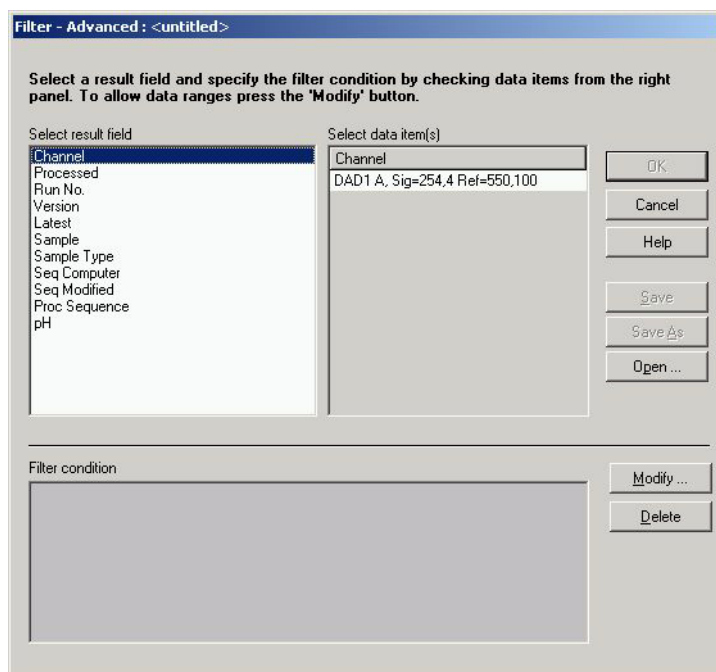


Figura 29 Creazione del proprio filtro

- 2 Fare clic su una categoria selezionandola nell'elenco "result field".
- 3 Fare clic sul tasto **Open**.

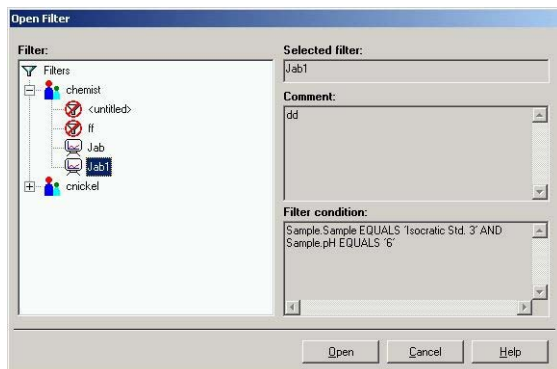


Figura 30 Finestra Open Filter

- 4 Fare clic su un filtro esistente nella struttura di selezione.

5 Presentazione dei risultati

Come filtrare i dati

5 Fare clic sul tasto **Open**.

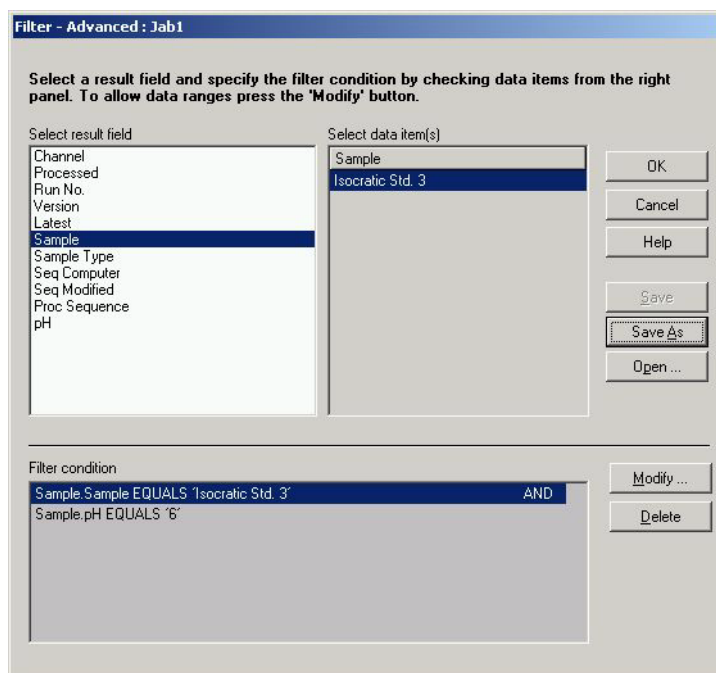


Figura 31 Finestra Filter - Advanced

6 Fare clic sul tasto **Save as**.

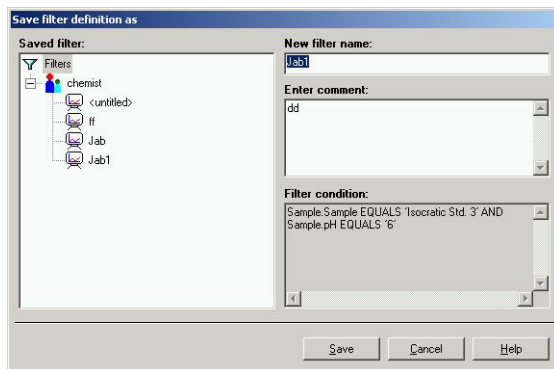


Figura 32 Finestra Save filter definition as

- 7 Inserire il nome per il nuovo filtro.
- 8 Inserire un commento.
- 9 Fare clic sul tasto **Save**.

5 Presentazione dei risultati

Come filtrare i dati

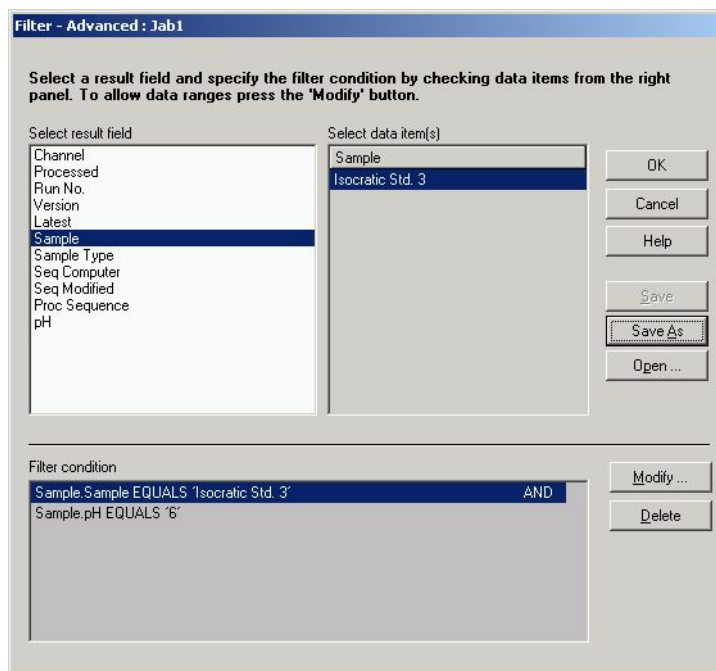


Figura 33 Finestra Filter - Advanced

10 Fare clic su **OK**.

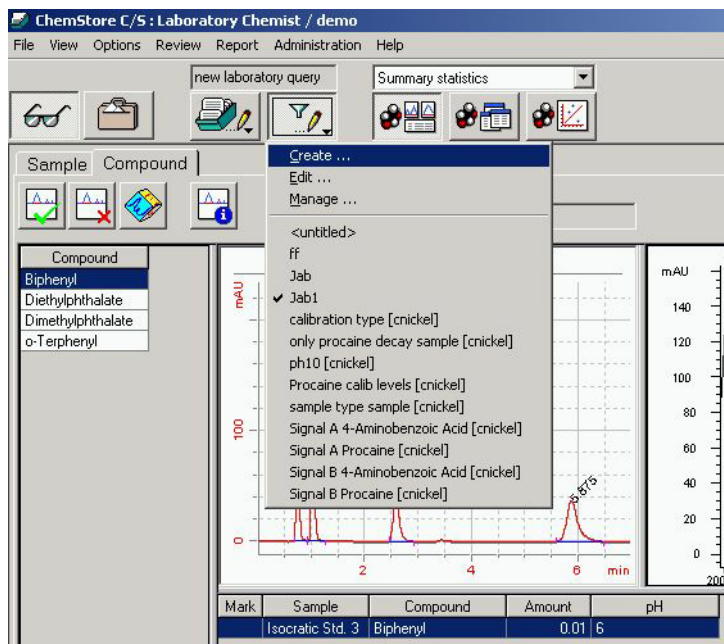


Figura 34 Visualizzazione del filtro attivo

11 Ora è possibile selezionare questo specifico filtro dal menu dei filtri esistenti.

Creazione del rapporto

Selezione del filtro

- 1 Fare clic sul tasto **View > Select Filter** e selezionare un filtro dal menu.

Selezione del rapporto

- 2 Fare clic sul tasto **Report menu**, quindi selezionare un rapporto dal menu o creare, modificare o gestire un rapporto.

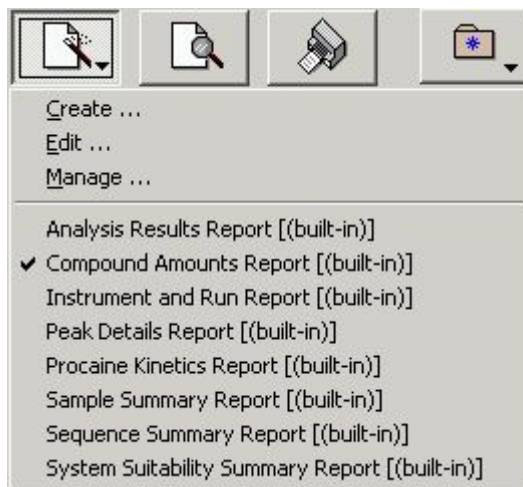
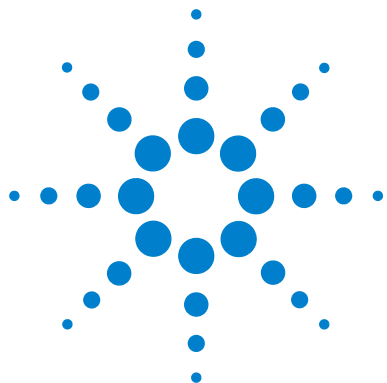


Figura 35 Selezione del rapporto dal menu

Stampa del rapporto

- 3 Fare clic sul tasto **Report preview** per generare il rapporto selezionato.



6

Rielaborazione di lotti

Creazione e caricamento di lotti [54](#)

Integrazione manuale [59](#)

In questo capitolo viene spiegato come selezionare un processo di trasferimento per la revisione di lotti, come trasferire un lotto alla ChemStation Plus e come elaborare i risultati.

Se si opera in un ambiente regolamentato secondo il 21 CFR Parte 11, Agilent consiglia di utilizzare la revisione di lotti per l'elaborazione dei dati. La revisione di lotti assicura la rintracciabilità completa e automatica di tutti i risultati.



Creazione e caricamento di lotti

Avvio di una query

- 1 Selezionare dal menu **File > Run Query > Part 11 demo latest versions only**.

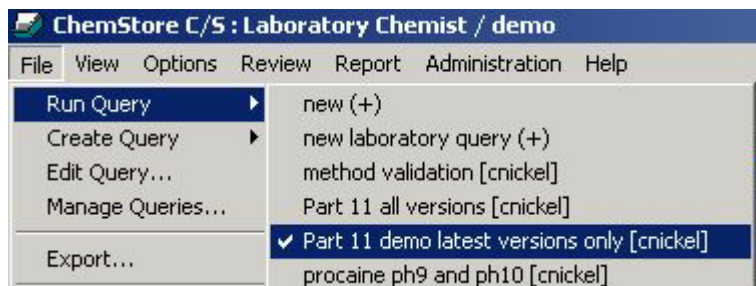


Figura 36 Avvio di una query

- 2 Per avviare la query, fare clic sui tasti **Execute** e **Retrieve**.
- 3 La query viene eseguita.

Creazione di un lotto

- 1 Selezionare un campione per la revisione di lotti facendo clic con il tasto destro nel menu contestuale. Si può selezionare un solo campione o tutti.

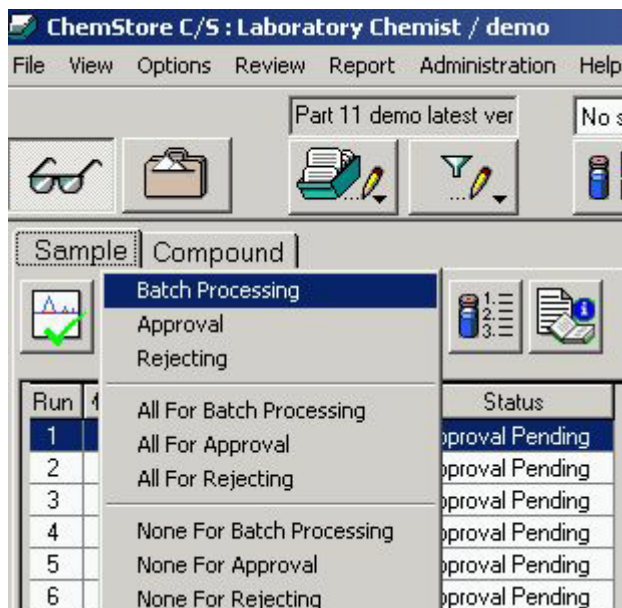


Figura 37 Selezione di un campione per Batch Processing

6 Rielaborazione di lotti

Creazione e caricamento di lotti

- 2 Selezionare la voce di menu **Review > Create Batch** o fare clic sul tasto **Create Batch** 



Figura 38 Menu Review > Create Batch

- 1 Selezionare nel menu **Batch > Load Batch > ChemStore**.

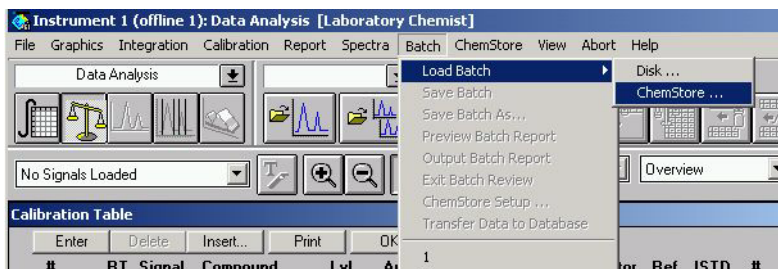


Figura 40 Caricamento del lotto

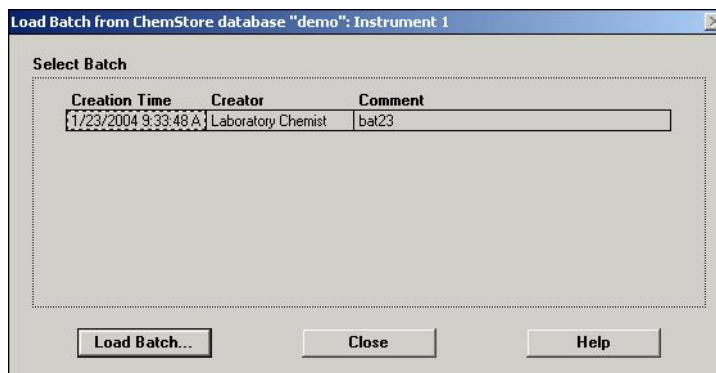


Figura 41 Lotto selezionato nel database

- 2 Sono visualizzati i lotti che sono assegnati all'utente attualmente collegato (o a tutti gli utenti).
- 3 Selezionare un lotto.
- 4 Fare clic sul tasto **Load Batch**.
- 5 Il lotto è pronto per la rielaborazione e la modifica.

NOTA

Fare riferimento ai manuali Security Pack User - Guida per l'utente e Comprendere la propria ChemStation per ulteriori informazioni sulla rielaborazione di lotti.

Integrazione manuale

Integrazione del picco

Nella revisione di lotti tutte le funzioni di elaborazione dei dati (Data Analysis) operano allo stesso modo che in assenza di tale processo. Nella revisione del lotto, tutti i file di dati selezionati per tale lotto sono elencati nella metà inferiore della finestra e possono essere selezionati facilmente. Gli eventi di integrazione manuale possono essere eseguiti e memorizzati con ciascun singolo cromatogramma, come mostrato in questa sezione.

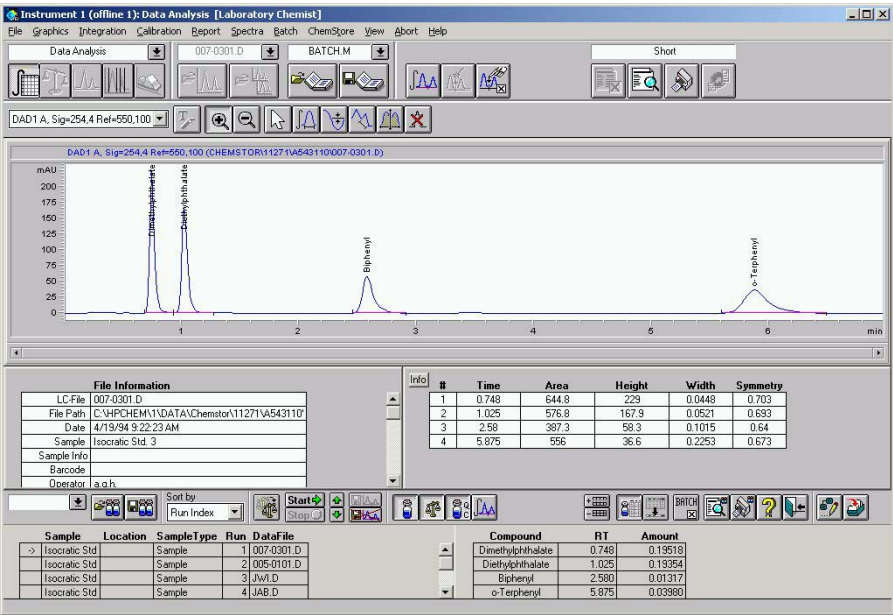


Figura 42 Cromatogramma e tabelle per la selezione del campione

- 1 Ingrandire il picco per il quale si vuole tracciare manualmente la linea di base.



Figura 43 Picco ingrandito

- 2 Selezionare nel menu **Integration > Draw Baseline**.



Figura 44 Tracciamento della linea di base

- 3 Tracciare manualmente la linea di base per il picco che si vuole integrare.

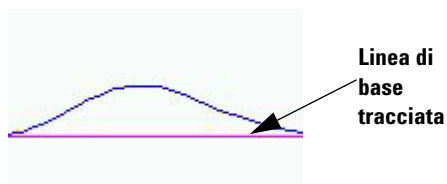


Figura 45 Linea di base tracciata manualmente

- 4 Per memorizzare la linea di base manuale, selezionare il successivo campione.



Figura 46 Messaggio "risultati modificati"

- 5 Fare clic su **OK** per salvare i risultati modificati.

Viene aperta la finestra **Comment for Batch Processing**. Per operare in conformità al 21 CFR Parte 11, è obbligatorio inserire un commento attestante la ragione della modifica.

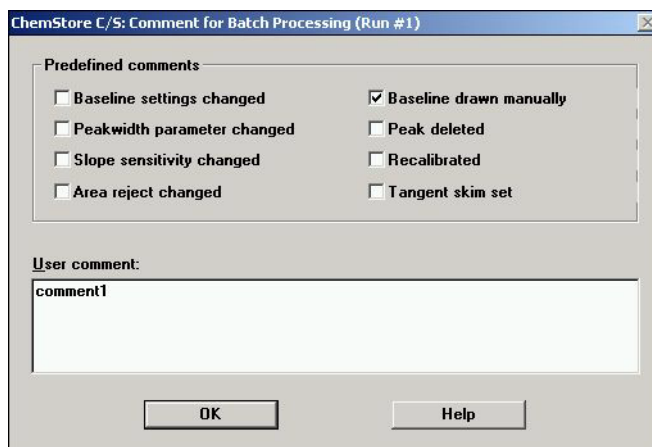


Figura 47 Commento al tracciamento della linea di base

- 6 Inserire un commento al tracciamento della linea di base o selezionarne uno predefinito.
- 7 Fare clic sul tasto **OK**.

NOTA

Se il Security Pack è installato, le modifiche nell'analisi contrassegnata sono salvate automaticamente nel database di ChemStore. Il tasto **Save Changes** vicino al tasto **Start** è inattivo. Se il Security Pack non è installato, il tasto **Save Changes** è attivo e l'utente deve salvare manualmente le modifiche effettuate.

Aggiornamento della calibrazione

Nella revisione di lotti la curva di calibrazione viene creata usando tutti gli standard del lotto. Per ulteriori dettagli sulla calibrazione nella revisione di lotti, consultare il manuale "Comprendere la propria ChemStation".

- 1 Selezionare nel menu **Batch > Update Calibration**.
- 2 Il programma ricalcola la curva di calibrazione.

Prima di rielaborare il lotto

- 1 Verificare la validità dei dati di tutte le analisi.
- 2 Il periodo di attesa fra le analisi predefinito è di 10 secondi. Selezionare un valore nel menu **Batch > Options** per modificare la durata di tale periodo.

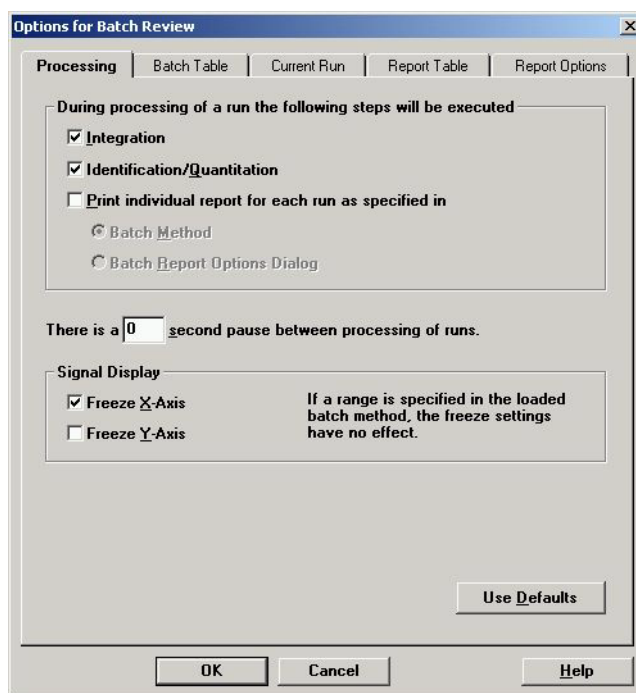


Figura 48 Finestra Options for Batch Review

- 3 Modificare la pausa da 10 a 0 secondi e fare clic sul tasto **OK**.

Rielaborazione del lotto

- 4 Fare clic sul tasto **OK**  per rielaborare il lotto con la nuova calibrazione.

Il programma inizia a rielaborare le analisi automaticamente. I risultati sono trasferiti e memorizzati in ChemStore con la nuova calibrazione.

- 5 Selezionare nel menu **Batch > Exit Batch Review** per uscire dal lotto.

Indice

A

Aggiornamento della calibrazione, [62](#)
Assegnazione dei campi personalizzati, [20](#)
Assegnazione di uno studio, [19](#)
Attivazione del filtro, [45](#)

C

Caricamento del lotto, [58](#)
Caricamento di una sequenza, [16](#)
ChemAccess, [9](#)
ChemStation Plus, [8](#)
ChemStore, [8](#)
Come filtrare i dati, [45](#)
Conformità al 21 CFR Parte 11, [61](#)
Create New Batch, finestra, [57](#)
Creazione del proprio filtro, [46](#)
Creazione del rapporto, [52](#)
Creazione di un lotto, [55](#)
Creazione di una query avanzata, [27](#)
Creazione e caricamento di lotti, [54](#)

D

Definizione delle colonne, [40](#)

E

Esecuzione di una query, [34](#)
Esecuzione di una sequenza, [23](#)

F

Flusso di lavoro della ChemStation Plus, [11](#)

I

Integrazione del picco, [59](#)

Integrazione manuale, [59](#)
Interfaccia utente vuota, [36](#)

L

Lotto selezionato nel database, [58](#)

M

Method and Run Control, finestra, [14](#)
Modifica del layout dell'interfaccia utente, [38](#)

P

Pacchetto di validazione del metodo, [8](#)
Preparazione del rapporto, [44](#)

Q

Query, [26](#)

R

Revisione di lotti, [53](#)
Rielaborazione del lotto, [63](#)

S

Salvataggio dell'interfaccia utente personalizzata, [41](#)
Salvataggio di una query, [34](#)
Security Pack, [8](#)
Selezione dei risultati per la visualizzazione, [40](#)
Selezione del filtro, [45](#)
Selezione del rapporto, [44](#)
Sequenza, [16](#)
Stampa del rapporto, [52](#)

T

Tipo di dato aggiunto, [40](#)
Tracciamento della linea di base, [60](#)

www.agilent.com

In questo volume

Questa guida contiene
istruzioni ed esercizi
dettagliati per utilizzare
la ChemStation Plus Agilent.

La guida descrive in
particolare le nuove
funzioni disponibili
tramite l'integrazione
di ChemStore Agilent
nella ChemStation Agilent.

© Agilent Technologies 2004

Stampato in Germania
03/2004



G2181-94011



Agilent Technologies